数理解析研究所講究録
944 巻 1996 年 273-281

マルチグリッド前処理付き自乗共役勾配法に関する研究

東京大学理学部情報科学科　襲田　勉 (Tsutomu Osoda)
東京大学理学部情報科学科　建部 修見 (Osamu Tatebe)

1 はじめに

係数行列が対称の問題の場合、共役勾配法の前処理としてマルチグリッド法 (MG 法) は非常に有効な前処理であった。この研究では係数行列が非対称の問題を考え、自乗共役勾配法 (CGS 法) の前処理として従来用いられてきた修正不完全 LU 分解 (MILU) のかわりに MG 法を用いた、マルチグリッド前処理付き自乗共役勾配法 (MGCGS 法) の提案をする。MG 前処理では非対称の係数行列を持つ問題の場合は粗いグリッドなるほど係数行列の非対称性が増してしまうため、あまり粗いグリッドまで使うことはできない。また MG 前処理ではグリッド数を少なくしていくと、係数行列の対称性が強まるにつれて反復回数が増大してしまうために、あまりグリッド数を少なくできない。そのため効率良い MG 前処理を行なうためには最適なグリッド数が存在する。この最適なグリッド数を求め、MGCGS 法の反復回数がメッシュの大きさに依存しないことを示し、大規模な問題になればなるほど MGCGS 法が修正不完全 LU 分解前処理付き CGS 法 (MILUCGS 法) よりも優れた解法となることを示す。

2 マルチグリッド前処理付き自乗共役勾配法

非対称な係数行列を持つ問題の解法として前処理付き CGS 法がよく用いられている。この研究では CGS 法の前処理として、良く用いられている MILU 前処理の代わりに MG 前処理を使う MGCGS 法を提案する。問題を $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ とするとアルゴリズムは表1のように表される。ここで C^{-1} は MG 前処理を表している。

また、MG 法は表 2のように再帰的に表される。プレスムージング、ポストスムージングで適用される反復法は緩和法と呼ばれ、用いる格子の種類はグリッド数と呼ばれる。特に γ が 1 のときには V サイクルマルチグリッド法と呼ばれ 2 のときには W サイクルマルチグリッド法と呼ばれる。数値実験に用いた前処理は V サイクルの MG 法を一反復だけ行なったものである。

3 問題と離散化法

対象とする問題は定常状態における二次元移流拡散方程式

$$\mathrm{div}\Big(-k\nabla u + \boldsymbol{b}u\Big) = f(x,y) \text{ in } \Omega \subset \Re^2$$

表 1. 前処理付き CGS 法

$\boldsymbol{r}_0 = C^{-1}(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x});$
$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{e} = \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_o;$
$\mu_1 = (\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r});$
while $\|\boldsymbol{r}\| > eps\|\boldsymbol{b}\|$ do
{
  $\boldsymbol{q} = C^{-1}A\boldsymbol{p};$
  $\alpha = \dfrac{\mu_1}{(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{q})};$
  $\boldsymbol{h} = \boldsymbol{e} - \alpha\boldsymbol{q};$
  $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{e} + \boldsymbol{h};$
  $\boldsymbol{q} = C^{-1}A\boldsymbol{e};$
  $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + \alpha\boldsymbol{e};$
  $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} - \alpha\boldsymbol{q};$
  $\mu_2 = \mu_1;\ \mu_1 = (\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r});\ \beta = \dfrac{\mu_1}{\mu_2};$
  $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{r} + \beta\boldsymbol{h};$
  $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{e} + \beta(\boldsymbol{h} + \beta\boldsymbol{p});$
}

表 2. MG 前処理

Vector MG(L_l, $\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{x}$, γ, μ)
{
  if (l == coarsest_level) Solve $L_l\boldsymbol{x} = \boldsymbol{f}$;
  else {
    $\boldsymbol{x}$ = pre_smoothing(L_l, $\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{x}$, μ);
    $\boldsymbol{d}$ = restrict($\boldsymbol{f} - L_l\boldsymbol{x}$);
    $\boldsymbol{\nu}$ = initial_$\boldsymbol{x}$;
    repeat (γ) $\boldsymbol{\nu}$ = MG(L_{l-1}, $\boldsymbol{d}$, $\boldsymbol{\nu}$, γ, μ);
    $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$ + prolongate($\boldsymbol{\nu}$);
    $\boldsymbol{x}$ = post_smoothing(L_l, $\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{x}$, μ);
  }
  return $\boldsymbol{x}$;
}

$$u = 0 \text{ on } \Gamma$$

とする。境界条件は固定で、拡散項の係数は一定であるとする。この方程式を二次元正方領域で中心差分法を用いて離散化する。この方程式を格子点の間隔の長さ h のメッシュで切ったとき、解の安定性や収束性のために離散化の条件として問題となるのはセルペクレ数で、2 以下という条件を満たすように離散化される。

$$\frac{|\boldsymbol{b}|h}{k} < 2$$

MG 法では格子点が粗いほどメッシュの間隔 h が長くなりセルペクレ数が増大するために、問題の性質は悪くなる。

4 数値実験の問題設定

実際に数値実験で使う問題では、移流項の係数は y 軸方向には 0 に固定をし、x 軸方向には様々な値をとるようにする。そのとき図 1にあるような方向に移流が生じることになる。また数値実験におけるベクトルの番号付けは図 2のようにし、収束条件は相対残差が 10^{-8} 以下とする。MG 法で粗い格子点上で方程式を立て直す際に、離散化の条件を満たさなくなったときには、その行列の成分を強制的に 0 にするようにしてある。

5 最適なグリッド数の存在とその解析

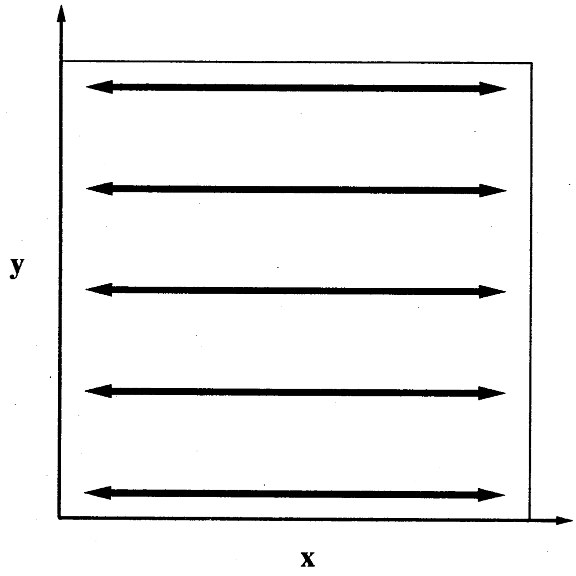


図 1. 移流項

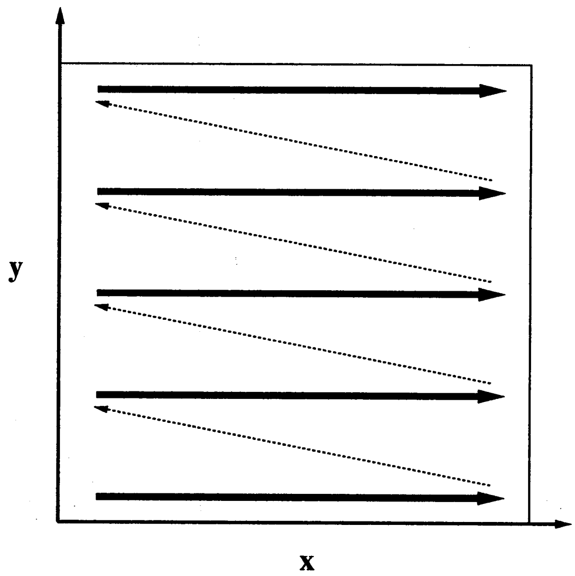


図 2. ベクトルの番号付け

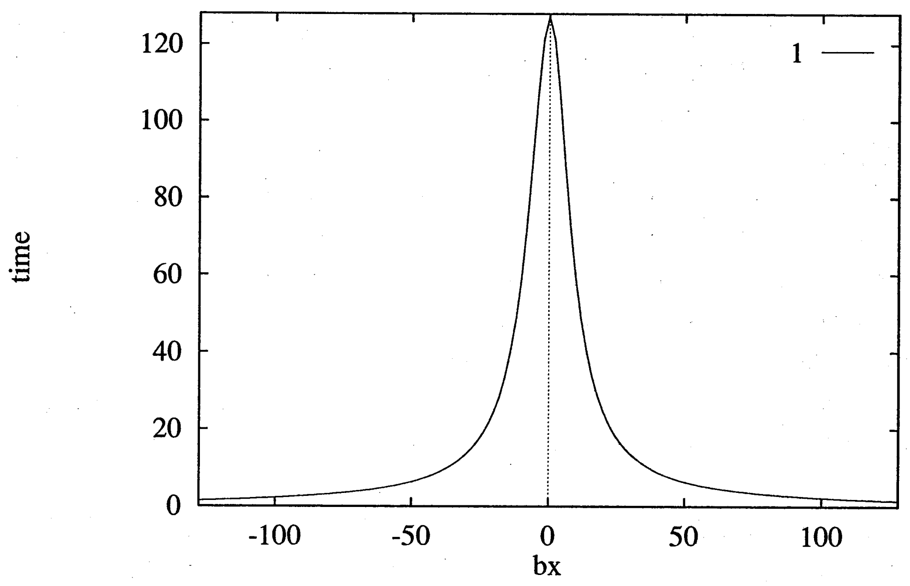


図 3. RB-GS 法で計算したときの解が収束するまでの計算時間

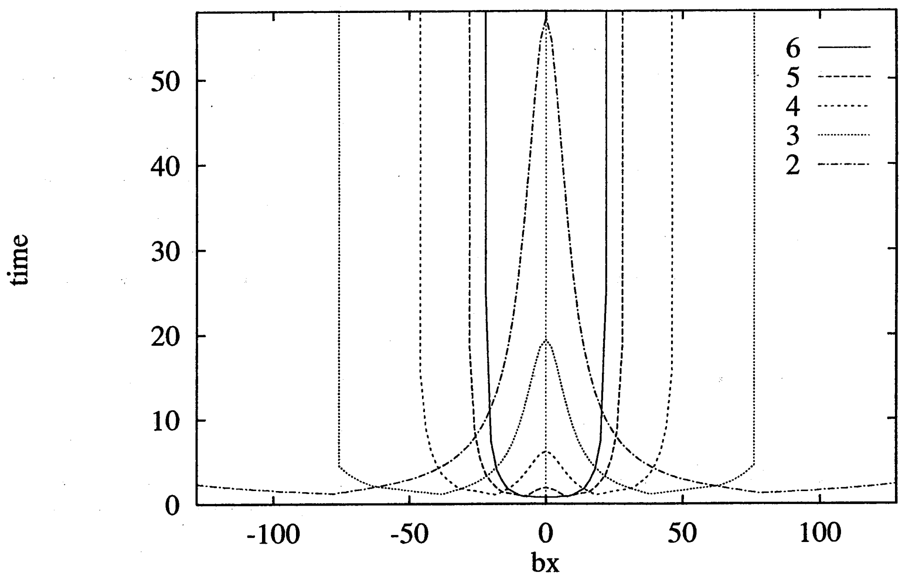


図 4. MG 法で計算したときの解が収束するまでの計算時間

MGCGS 法の計算時間とグリッド数の関係について、数値実験を通じて考察する。MGCGS 法の性質を見るために MG 法の性質を見、MG 法の性質を見るために緩和法として用いたレッドブラックガウスザイデル法 (RB-GS 法) を見る。この逆の順序で考察を進める。また対象とする問題は二次元の移流拡散方程式を正方領域上で中心差分法を用いて 63×63 のメッシュで離散化したものとする。

図 3はその連立一次方程式を RB-GS 法を使ってといたときの収束するまで計算時間を表している。横軸には x 軸方向の移流項の係数の値を、縦軸には収束するまでの計算時間をとってある。この図から RB-GS 法の特徴として、移流項の係数が 0 に近いほどすなわち係数行列の対称性が強いほど反復回数が増大するために計算時間が長くなることがわかる。また y 軸に関してグラフがほぼ対称であることがわかる。つまり移流項の大きさが一致するならば、移流の方向が反対であっても RB-GS 法はほぼ同じ反復回数、計算時間であることがわかる。注意してもらいたいのは 63×63 のメッシュで離散化したときに移流項の係数の大きさが 128 以上のときには収束定理を満たさなくなるので RB-GS 法は収束しなくなるということである。

図 4は同じ問題を MG 法で解いたときの計算時間を示している。図の中には 5 本の線があるが、それぞれの線にふられた数値がグリッド数を表している。横軸には x 軸方向の移流項の係数の値を、縦軸には収束するまでの計算時間をとってある。MG 法でも y 軸に関してグラフがほぼ対称であることがわかる。つまり移流項の大きさが一致するならば、移流の方向が反対であっても MG 法はほぼ同じ反復回数、計算時間であることがわかる。こ

れは緩和法としてRB-GS法を採用しているためにおこる現象である。またMG法ではグリッド数が少ないほど緩和法の性質が現れ、その場合には係数行列の対称性が増すほど反復回数の増加が急激になり計算時間が増大する。これは最も粗い格子点上での方程式に対し一定回数しか反復法を適用していないために起こるものである。最も粗い格子点上の方程式を解いた場合には反復回数の増加は起こらない。しかしながら実用上は最も粗い格子点上で方程式を解くということは行なわれていない。従ってグリッド数が少な過ぎると、係数行列の対称性が強いときには、反復回数の急激な増加が起こりMG法がCGS法の前処理として適さなくなると考えられる。逆にグリッド数が多いほど、移流項の大きさが小さい場合でもMG法は発散し、解ける問題の範囲が狭くなる。これはメッシュ間隔の減少により粗い格子点上で係数行列の非対称性が増加するために、粗い格子点上の解の不安定性から生じる、より細かな格子点上の解に対する近似の悪さが原因で収束性が悪くなるためである。従ってグリッド数が多過ぎると、係数行列の非対称性が強い場合にはMG法がCGS法の前処理として適さなくなると考えられる。従って移流項の係数の値に対応した最適なグリッド数が存在する。表3はMG法で解くときの最適なグリッド数を示したものである。一番左の列には

表3. MG法での解く場合の最適なグリッド数

	1×1	3×3	7×7	15×15	31×31	63×63
31×31	0-10	10-15	14-33	33-55	54-64	
63×63	0-8	6-16	14-32	30-62	60-112	110-128

問題を離散化したときの格子点数を、欄の中の数値は移流項の係数の大きさを示している。移流項の係数の大きさが欄の中の範囲に適合する場合には、その列の一番上の行に示してある格子点数まで粗くするのが最適であるということを示している。また最も細かい格子点上でも離散化の条件を満たさないような大きさの移流項の問題は計算には入れていない。MG法の場合には表3から、最適なグリッド数は離散化したときの点数には関係なく、最も粗いグリッドで離散化の条件を満たさなくなるときであることがわかる。

図5はMGCGS法で解いたときの計算時間を示している。図の中には5本の線があるが、それぞれにふられた数値はMG前処理で用いたグリッド数を表している。横軸にはx軸方向の移流項の係数の値を、縦軸には収束するまでの計算時間をとってある。MGCGS法でもy軸に関してグラフがほぼ対称であることがわかる。つまり移流項の大きさが一致するならば、移流の方向が反対であってもMGCGS法はほぼ同じ反復回数、計算時間であることがわかる。これは前処理としてRB-GS法を緩和法として持つMG法を採用しているためにおこる現象である。図4と図5を比較することで、MG法では収束しないような係数行列の非対称性が強い問題に対してもMGCGS法では収束していること、MG法とMGCGS法とでグリッド数の観点から眺めたグラフの上下関係が類似していることがわかる。つまりMGCGS法ではMG法の性質は保ちつつ収束性が格段に改善されている。表4はMGCGS法での解くときの最適なグリッド数を示したものである。一番左の列には問題を離散化したときの格子点数を、欄の中の数値は移流項の係数の大きさを示してある。移流項の係数の大きさが欄の中の範囲に適合する場合には、その列の一番上の行に示してある格子点数まで粗

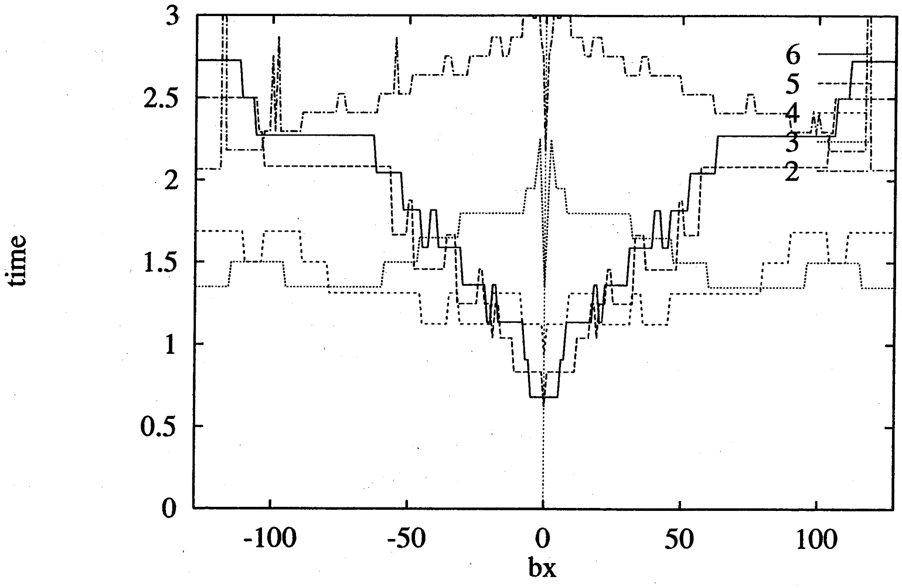


図 5. MGCGS 法で計算したときの解が収束するまでの計算時間

表 4. MGCGS 法での解く場合の最適なグリッド数

	1×1	3×3	7×7	15×15	31×31
31×31	0-6	4-26	18-64	51-64	
63×63	0-6	5-20	15-80	60-128	
127×127	0-6	4-20	18-70	58-256	
255×255	0-8	4-20	16-90	76-436	348-512

くするのが最適であるということを示している。また最も細かい格子点上でも離散化の条件を満たさないような大きさの移流項の問題は計算には入れていない。表4からMGCGS法ではMG法で最適なグリッド数よりも多いグリッド数で最短の計算時間になることがわかる。

6 MILUCGS法とMGCGS法の比較

図6、図7、図8はMILUCGS法とMGCGS法の計算時間の比較を行なったものである。横軸にはx軸方向の移流項の係数の値を、縦軸には収束するまでの計算時間をとってある。図の中には様々な線があるがMILUとふられている線がMILUCGS法の収束するまでの計算時間をそれ以外の数字のふられた線はMGCGS法で用いたグリッド数を示している。図6から31×31のメッシュで離散化したときには、移流項の係数が大きな値のときにはMILUCGS法の方が速いが、それ以外の範囲ではMGCGS法の方が速いことがわかる。同様に図7から63×63のメッシュで離散化したときにも、移流項の係数が大きな値のときにはMILUCGS法の方が速く、それ以外の範囲ではMGCGS法の方が速いことがわかるが、MILUCGS法の方が速くとける領域の割合は31×31のメッシュで離散化したときに比べて減っていることがわかる。さらに図8からMILUCGS法の方が速くとける領域の割合はかなり減って、ほぼ全ての領域でMGCGS法の方が速いことがわかる。以上のことをまとめるとMGCGS法は従来用いられてきたMILUCGS法よりも速く収束し、しかもその現象は大規模な問題になればなるほど顕著になっていくということがわかる。表5は二次元の移流拡散方程式で

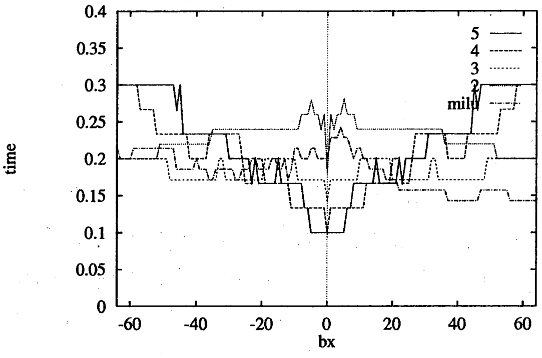
表5. MGCGS法の計算時間と反復回数

メッシュの大きさ	計算時間(秒)	反復回数
31×31	0.1	3
63×63	0.7	3
127×127	4.7	3
255×255	16.5	2

係数は固定をし中心差分法を用いて離散化した問題をMGCGS法で解いたものである。この実験ではMG法の緩和法としてRB-GS法を使っている。表5からMG法の特徴であった解が収束するまでの反復回数がメッシュの大きさには依存しないという性質を今回提案したMGCGS法も持っていることがわかる。

7 まとめ

MGCGS法はMG法では収束しないような非対称性の強い係数行列をもつ問題でも収束することがわかった。MG法では最も粗いグリッドで離散化の条件を満たさなくなるときに、最短の計算時間になるが、MGCGS法では収束性が改善されているためにMG法で最適なグリッド数よりも多いグリッド数で最短の計算時間になることがわかった。



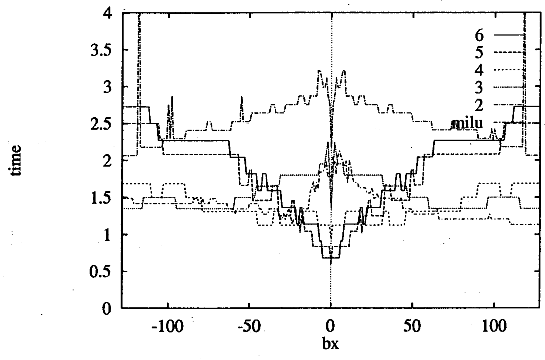


図 6. MILUCGS 法と MGCGS 法の移流項の大きさ対する計算時間の比較 (メッシュが 31×31 のとき)

図 7. MILUCGS 法と MGCGS 法の移流項の大きさ対する計算時間の比較 (メッシュが 63×63 のとき)

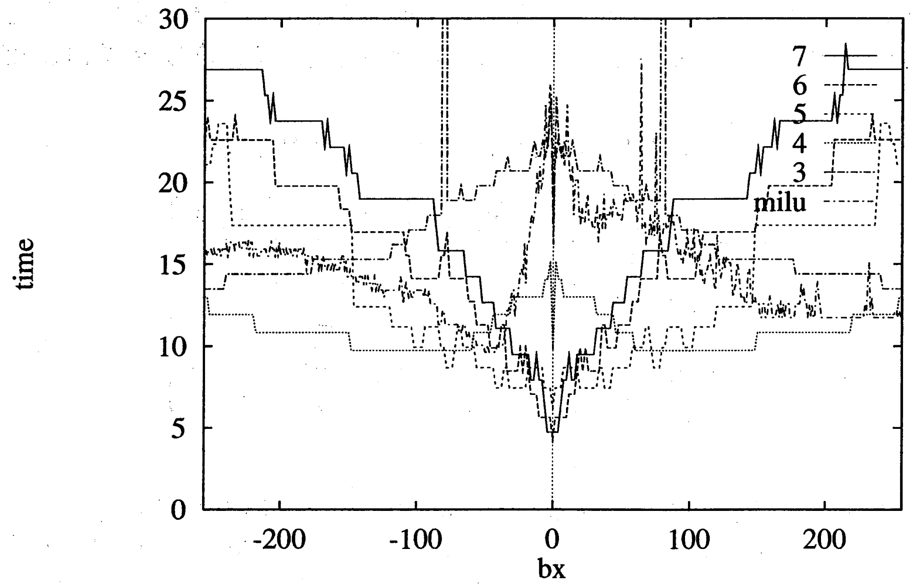


図 8. MILUCGS 法と MGCGS 法の移流項の大きさ対する計算時間の比較 (メッシュが 127×127 のとき)

MGCGS 法は大規模な問題になっても一定の反復回数であるため、MILUCGS 法と比べると大規模な問題になるほど MGCGS 法の優位性が認められた。

8 課題

対称な係数行列を持つ問題に対する MG 前処理の有効性は固有値解析によって示されたが、非対称な係数行列に対しても固有値解析に類似した方法で MG 前処理の有効性を示していきたいと思う。今回は具体的に MG 法と MGCGS 法の関係を求められなかったわけだが、これを含めて MGCGS 法の性質を研究していきたいと思う。また MGCGS 法を並列計算機上で実装し、MG 前処理が高並列で効率の良い解法であることを示したいと思う。また今回はアルゴリズムの中で転置行列を必要としないことから CGS 法を選んだわけだが、それ以外の CG 法系統の解法に対しても MG 前処理を適用しその性質を調べたいと思う。

9 あとがき

この論文は 1993 年 10 月に京都大学数理解析研究所で開催された研究会で発表されたものである。

参考文献

[1] Wolfgang Hackbusch. *Multi-grid Methods and Application.* Springer Verlag, 1985.

[2] Osamu Tatebe. "The Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Method". In *the proceedings of Sixth Copper Montain Conference, NASA CP*, 1993 (to appear).

[3] Pieter Wesseling. *AN INTRODUCTION TO MULTIGRID METHODS.* JOHN WILEY AND SONS, 1991.

[4] 建部 修見 小柳義夫. "マルチグリッド前処理付き共役勾配法の並列化". JSPP '93 論文集 pp.387–394, May 18 1993.

[5] 村田 健郎 名取 亮 唐木幸比古. 大型数値シミュレーション. 岩波書店, 1990.